МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ СТРУКТУР. СТАТЬЯ 2

Ю. Л. Войтеховский^{1,2}, А. А. Захарова¹, М. Д. Климоchenков³

¹ Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург

² Геологический институт ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты

³ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва

Voytekhovskiy_YuL@pers.spmi.ru

Для целей моделирования и классификации структур и текстур биминеральных горных пород предложена диаграмма нового типа — барицентрический тетраэдр (p_{iii} , p_{ij} , p_{ij} , p_{jj}) вероятностей тернарных межзерновых контактов. Рассчитано положение линии равновесия Харди — Вайнберга. Установлены соответствия между полями и границами классификации в барицентрическом тетраэдре и ранее предложенном барицентрическом треугольнике (p_{ii} , p_{ij} , p_{jj}) вероятностей бинарных межзерновых контактов. Обсуждены перспективы классификации петрографических структур и текстур в барицентрическом тетраэдре на основе классификации Ньютона кривых 3-го порядка.

Ключевые слова: кристаллические горные породы, петрографические структуры и текстуры, равновесие Харди — Вайнберга.

MODELING PETROGRAPHIC STRUCTURES. PAPER 2

Yu. L. Voytekhovskiy^{1,2}, A. A. Zakharova¹, M. D. Klimochenkova³

¹ Saint-Petersburg Mining University, Saint-Petersburg

² Geological Institute FRC KSC RAS, Apatity

³ National University of Science and Technology «MISIS», Moscow

Voytekhovskiy_YuL@pers.spmi.ru

For the purposes of modeling and classification of structures and textures of bimineral rocks, a diagram of a new type is proposed — a barycentric tetrahedron (p_{iii} , p_{ij} , p_{ij} , p_{jj}) of probabilities of ternary intergrain contacts. The position of the Hardy-Weinberg equilibrium line is calculated. Correspondences between the classification fields and boundaries in the barycentric tetrahedron and the previously proposed barycentric triangle (p_{ii} , p_{ij} , p_{jj}) of the probabilities of binary intergrain contacts are established. The prospects for the classification of petrographic structures and textures in a barycentric tetrahedron based on Newton's classification of curves of the 3rd order are discussed.

Keywords: crystalline rocks, petrographic structures and textures, Hardy-Weinberg equilibrium.

Введение

Удачная феноменологическая классификация петрографических структур и текстур должна предусматривать возможность ее физической интерпретации. Исторический пример — теория кристаллического пространства с решетками Браве, правильными системами точек, федоровскими группами симметрии и т. д. С оговорками буквально в каждом законе, но кристаллохимия постепенно наполняет термодинамическим содержанием эту изначально геометрическую конструкцию. В горных породах обращают на себя внимание бинарные (2-мерные, по поверхностям), тернарные (1-мерные, по ребрам) и куотернарные (0-мерные, в точках) межзерновые контакты — дефекты структуры, зоны разрыва химических связей, каналы свободной энергии [1, 9]. После установления равновесия горной породы как физико-химической системы наступает период дополнительной минимизации свободной энергии ее межзерновых границ [2, 3]. Эффект столь значителен, что в мономинеральных горных породах (мраморах, кварцитах), фирновом льде, керамике, отоженных металлах и сплавах реа-

лизуется «структура Коксета» сухой пены (с толщиной стенок в одну молекулу H_2O) вопреки требованиям кристаллической решетки минеральной фазы [6].

В предыдущей статье даны примеры 2D-моделирования (в сечениях) биминеральных петрографических структур и текстур в барицентрическом треугольнике (p_{ii} , p_{ij} , p_{jj}) вероятностей бинарных межзерновых контактов, обсуждены их соотношения с линией равновесия Харди — Вайнберга [5, рис. 3]. Далее для целей моделирования и классификации структур и текстур предложена диаграмма нового типа — барицентрический тетраэдр (p_{iii} , p_{ij} , p_{ij} , p_{jj}) вероятностей тернарных межзерновых контактов. Рассчитано положение линии равновесия Харди — Вайнберга в нем, установлены соответствия между полями и границами классификации в обеих диаграммах.

Массивные текстуры и равновесие Харди — Вайнберга

«Массивная текстура, Науман — текстура пород зернистой структуры без особой ориентировки со-

Для цитирования: Войтеховский Ю. Л., Захарова А. А., Климоchenков М. Д. Моделирование петрографических структур. Статья 2 // Вестник геонаук. 2020. 12(312). С. 32—35. DOI: 10.19110/geov.2020.12.3.

For citation: Voytekhovskiy Yu. L., Zakharova A. A., Klimochenkova M. D. Modeling petrographic structures. Paper 2. Vestnik of Geosciences, 2020, 12(312), pp. 32—35, doi: 10.19110/geov.2020.12.3.

ставных частей, однородных во всех направлениях. См. беспорядочно-зернистая структура. <...> Беспорядочно-зернистая структура, Розенбуш — структура без определенной ориентировки зерен, т. е. одинаковая во всех направлениях; типичная структура пород массивной текстуры» [7, с. 42, 189]. Важно, что в приведенных определениях применительно к массивной текстуре (и, по-видимому, только к ней) категории текстуры и структуры отождествляются, ибо здесь составные части сводятся к минеральным зернам.

Но не только в этом состоит ее особенность. Среди петрографических структур и текстур массивная текстура — единственная, которая может быть определена строго как равновесие вероятностей p_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$) Харди — Вайнберга разных межзерновых контактов при заданных вероятностях p_i минеральных зерен разных видов в n -минеральной горной породе:

$$(p_1 m_1 + \dots + p_n m_n)^2 = \sum p_{ij} m_i m_j = 1,$$

где $m_i m_j$ имеет смысл бинарного контакта минеральных зерен i -го и j -го видов, $p_{ii} = p_i^2$, $p_{ij} = 2p_i p_j$.

Для простейшего случая ($n = 2$) линия равновесия Харди — Вайнберга задается уравнением $p_{11} p_{22} = (p_{12} / 2)^2$ в барицентрическом треугольнике вероятностей (p_{11} , p_{22} , p_{12}) [5, рис. 3]. Неожиданность состоит в том, что массивные текстуры образуют не поле диаграммы (выше или ниже линии равновесия), а границу между ними, на которую фигуративная точка реальной текстуры (для которой подсчитаны вероятности p_{11} , p_{22} , p_{12}) попасть не может. Это кажется тем более странным, что массивные текстуры известны во всех классах горных пород (от кислых до ультраосновных). Строго говоря, отнесение текстуры к массивной — статистическая задача, решаемая с помощью критериев согласия [4].

Равновесие Харди — Вайнберга для тернарных контактов

Уже на примере биминеральных горных пород видно, что статистика тернарных межзерновых контактов более информативна, чем статистика бинарных контактов. Вероятности тернарных контактов (p_{111} , p_{112} , p_{122} , p_{222}) могут быть показаны в барицентрическом тетраэдре. При этом каждый тернарный контакт порождает три бинарных вполне определенного вида (рис. 1). Это позволяет установить соотношения между ними: $p_{11} = p_{111} + p_{112}/3$, $p_{22} = p_{222} + p_{122}/3$, $p_{12} = 2p_{112}/3 + 2p_{122}/3$.

Рис. 1. Тернарные контакты однозначно определяют разнообразие бинарных

Fig. 1. Ternary contacts uniquely define the variety of binary contacts

Подстановкой этих значений в уравнение равновесия Харди — Вайнберга для биминеральной горной породы $p_{11} p_{22} = (p_{12} / 2)^2$ получим уравнение класси-

фицирующей поверхности (К-поверхности), разбивающей тетраэдр на две области:

$$(3p_{111} + p_{112})(p_{122} + 3p_{222}) = (p_{112} + p_{122})^2.$$

Ее следы на гранях барицентрического тетраэдра показаны на рис. 2.

Уравнение линии равновесия Харди — Вайнберга для полиминеральной горной породы в вероятностях тернарных контактов имеет вид:

$$(p_1 m_1 + \dots + p_n m_n)^3 = \sum p_{ijk} m_i m_j m_k = 1,$$

где $m_i m_j m_k$ имеет смысл тернарного контакта минеральных зерен i, j и k -го видов, $p_{iii} = p_i^3$, $p_{ijj} = 3p_i^2 p_j$, $p_{ijk} = 6p_i p_j p_k$. Для биминеральной горной породы: $p_{111} = p_1^3$, $p_{112} = 3p_1^2 p_2$, $p_{122} = 3p_1 p_2^2$, $p_{222} = p_2^3$. Линия равновесия лежит в К-поверхности (рис. 2).

Рис. 2. К-поверхность (красные линии — следы на гранях тетраэдра) и линия равновесия Харди — Вайнберга (синяя) в барицентрическом тетраэдре во фронтальной (слева) и аксонометрической (справа) проекциях. К-поверхность и линия равновесия симметричны относительно оси L_2 тетраэдра

Fig. 2. K-surface (red lines — traces on the faces of the tetrahedron) and the Hardy-Weinberg equilibrium line (blue) in the barycentric tetrahedron in the frontal (left) and axonometric (right) projections. K-surface and the equilibrium line are symmetrical about the L_2 axis of the tetrahedron

Итак, линия равновесия Харди — Вайнберга является классификационной границей лишь для простейшего случая бинарных контактов в биминеральных горных породах, т. е. в барицентрическом треугольнике. Уже в барицентрическом тетраэдре, т. е. для тернарных контактов в биминеральных горных породах, а тем более для полиминеральных горных пород, независимо от типов контактов (бинарные или тернарные), она таковой не является. Но во всех случаях может быть построена К-поверхность, разбивающая соответствующую диаграмму (треугольник, тетраэдр, ... многомерный симплекс) на два поля, в которых равновесие Харди — Вайнберга нарушается в сторону моно- или полиминеральных межзерновых контактов. Именно их сочетание определяет все разнообразие петрографических структур и текстур.

Перспективы классификации

Два класса структур и текстур вряд ли удовлетворят петрографов даже в случае биминеральных горных пород. Каковы перспективы более детальной клас-

сификации в терминах вероятностей межзерновых контактов? Линия равновесия Харди — Вайнберга в барицентрическом треугольнике задана уравнением $p_{11}p_{22} = (p_{12}/2)^2$ и разделяет области, в которых фигуративные точки определяют эллипсы $p_{11}p_{22} > (p_{12}/2)^2$ или гиперболы $p_{11}p_{22} < (p_{12}/2)^2$ с общим уравнением центральной кривой 2-го порядка $\sum p_{ij} m_i m_j = 1$ ($i, j = 1, 2$). Эти линии названы нами структурными индикатрисами. (Очевидна аналогия с коноскопическими фигурами, которые суть результаты статистического взаимодействия луча света с атомами кристаллической решетки, преобразованные с помощью линз в геометрические образы. Переход из поля эллипсов в поле гипербол выглядит как удлинение эллипсов, их разрыв в любой точке линии равновесия Харди — Вайнберга в пару параллельных прямых и далее изгибание последних в ветви гипербол.)

Аналогично, барицентрический тетраэдр может быть разбит на области, в которых сохраняют свой топологический тип (число асимптот, ветвей, их взаимное или самопересечение, наличие изолированных точек, ...) структурные индикатрисы 3-го порядка, задаваемые общим уравнением $\sum p_{ijk} m_i m_j m_k = 1$ ($i, j, k = 1, 2$). Проблема состоит в адаптации классификации Ньютона кривых 3-го порядка на плоскости [8]. Некоторые из них показаны на рис. 3.

Рис. 3. Кривые 3-го порядка на плоскости

Fig. 3. Cubic curves on the plane

Выводы

Линия равновесия Харди — Вайнберга — математическое выражение массивной текстуры — образует не поле, а границу в любой барицентрической диаграмме: вероятностей бинарных или тернарных контактов в биминеральной или полиминеральной горной породе. Фигуративная точка структуры и текстуры реальной горной породы не может попасть на линию равновесия. Отнесение текстуры к массивной — статистическая задача, решаемая с помощью критериев согласия.

Лишь в простейшем случае (бинарные контакты в биминеральной горной породе) линия равновесия служит классификационной границей и разбивает барицентрический треугольник на два поля — с нарушением равновесия в сторону моно- или полиминеральных контактов. В барицентрическом тетраэдре

(тернарные контакты в биминеральной горной породе) рассчитана соответствующая К-поверхность, разбивающая его на два поля. Линия равновесия Харди — Вайнберга лежит в К-поверхности.

Перспектива детализации классификации структур и текстур горных пород по статистикам тернарных контактов видится в методе структурной индикатрисы. Для биминеральных горных пород он состоит в адаптации классификации Ньютона кривых 3-го порядка на плоскости, т. е. в указании соотношений между вероятностями ($p_{111}, p_{112}, p_{122}, p_{222}$) для отнесения структур и текстур к тому или иному типу.

Проблема строгого определения и классификации петрографических структур и текстур порождает нетривиальные математические задачи, что говорит о содержательности подхода. Криволинейные классификационные границы, выражающие межзерновые отношения в горных породах в терминах вероятностей, позволяют усомниться в корректности прямолинейных границ в аналогичных барицентрических диаграммах, принятых (обычно путем соглашения) для минеральных систем.

Авторы благодарят рецензентов за конструктивные замечания, способствовавшие более ясному изложению результатов.

Литература

1. Бельский В. З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Феноменологический подход. М.: Наука, 1980. 88 с.
2. Бродская Р. Л. Термодинамические (кинетические) критерии формирования и эволюции структуры минеральных агрегатов // Зап. ВМО. 1988. № 5. С. 623—633.
3. Вернон Р. Х. Метаморфические процессы. М.: Недра, 1980. 228 с.
4. Войтеховский Ю. Л., Захарова А. А. Массивная текстура горной породы: гранит массива Акжайлыу, Казахстан // Труды XV Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: К & М, 2018. С. 56—57. <https://doi.org/10.31241/MIEN.2018.15.07>
5. Войтеховский Ю. Л., Захарова А. А. Моделирование петрографических структур // Вестник геонаук. 2020. № 10. С. 38—42. <https://doi.org/10.19110/geov.2020.10.5>.
6. Жабин А. Г. Онтогенез минералов. Агрегаты. М.: Наука, 1979. 275 с.
7. Левинсон-Лессинг Ф. Ю., Струве Э. А. Петрографический словарь. М.: Гостеоиздат, 1963. 448 с.
8. Савелов А. А. Классификация Ньютона. Плоские кривые: систематика, свойства, применения. Москва — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. С. 44—53.
9. Салтыков С. А. Стереометрическая металлография. М.: Металлургия, 1958. 446 с.

References

1. Belenkiy V. Z. *Geometriko-veroyatnostnye modeli kristallizatsii. Fenomenologichesky podhod* (Geometric-probabilistic models of crystallization. Phenomenological approach). Moscow: Nauka, 1980, 88 pp.
2. Brodskaya R. L. *Termodinamicheskiye (kineticheskiye) kriterii formirovaniya i evolyutsii struktury mineralnykh agregatov* (Thermodynamic (kinematic) criteria of formation and evolution

of mineral aggregates structures). Proc. Rus. Mineral. Soc, 1988, No. 5, pp. 623—633.

3. Vernon R. H. *Metamorficheskiye processy* (Metamorphic processes). Moscow: Nedra, 1980, 228 pp.

4. Voytekhoyskiy Yu. L., Zakharova A. A. *Massivnaya tekstura gornoy porody: granit massiva Akzhailau, Kazakhstan* (Massive texture of a rock: granite of the Akzhailau massif, Kazakhstan). Proc. 15th Rus. Sci. School «Math. Invest. in Natural Sci.». Apatity: K & M, 2018, pp. 56—57. <https://doi.org/10.31241/MIEN.2018.15.07>

5. Voytekhoyskiy Yu. L., Zakharova A. A. *Modelirovaniye petrograficheskikh struktur* (Modeling petrographic structures). Vestnik geonauk, 2020, No. 10, pp. 38—42. <https://doi.org/10.19110/geov.2020.10.5>.

6. Zhabin A. G. *Ontogeniya mineralov. Agregaty* (Ontogeny of minerals. Aggregates). Moscow: Nauka, 1979. 275 pp.

7. Levinson-Lessing F. Yu., Struve E. A. *Petrograficheskiy slovar* (Petrographic dictionary). Moscow: Gosgeolizdat, 1963, 448 pp.

8. Savelov A. A. *Klassifikatsiya Nyutona. Ploskiye krivyye: sistematika, svoystva, primeneniya* (Newton's classification. Flat curves: systematics, properties, applications). Moscow — Izhevsk: NIC «Regular and chaotic dynamics», 2002, pp. 44—53.

9. Saltykov S. A. *Stereometricheskaya metallografiya* (Stereometric metallography). Moscow: Metallurgy, 1958, 446 pp.

Поступила в редакцию / Received 07.12.2020